Index

Pagina

Commentationes

ADAM, W., and A. GRIMISON: Sigma-Polarization in 5-Membered Heterocyclic Ring Systems 342
AMOS, A. T.: Self-Consistent Perturbation Theory for Conjugated Molecules. IV. First Order Changes in Orbital Energies, Correlation with Ionization Potentials and Polarographic Reduction and Oxidation Potentials of Heteromolecules 20

BALDANZA, B.: see FURLANI, C., E. CERVONE, and F. CALZONA 375
BALLHAUSEN, C. J.: see HOLT, S. L. 313
BARNETT, G. P.: Reduced-Density-Matrix Theory: The Electron-Pair Approximation . 410
BERTHIER, G.: voir SUREAU, A. 41
— s. SUARD, M., et G. DEL RE 236
BESNAINOU, S.: voir RAZAFINDRAKOTO, E. 321
BONAMICO, M., G. DESSY, and A. VACIAGO: The Crystal Structure of Bis-trimethylbenzylammoniumtetrachlorocuprate (II) 367
BROWN, R. D., and B. A. W. COLLER: Theoretical Calculation of Electric Dipole Moments for Conjugated Systems 259

CALZONA, F.: see FURLANI, C., E. CERVONE, and B. BALDANZA 375
CARLES, P.: voir JULG, A. 103
CERVONE, E.: see FURLANI, C., F. CALZONA, and B. BALDANZA 375
CIGNITTI, M., and L. PAOLONI: The Electronic Structure of Groups of Isomeric Hetero-Aromatic Systems. I. Derivatives of 1, 2, 4-Oxadiazole 383
CLEMENTI, E.: see VEILLARD, A. 133
COLLER, B. A. W.: see BROWN, R. D. 259

DAY, P.: A Theory of the Optical Properties of Vitamin B_{12} and its Derivatives 328
DEL RE, G.: s. SUARD, M., et G. BERTHIER 236
DENIS, A., and A. PULLMAN: Theoretical Study of the Electronic Properties of Biological Purines and Pyrimidines. III. The Representation of the Methyl Group and the Structure of Thymine 110
DESCHAMPS, J.: voir LEIBOVICI, C. 157
DESSY, G.: see BONAMICO, M., and A. VACIAGO 367
DINER, S., and J. P. MALRIEU: Molecular Deformation and Vibrational Structure of the First U. V. Band in Linear Polyenes 15

FAVINI, G., S. TROVATO, and A. GAMBA: Molecular Geometry and Electronic Structure of Chloro-substituted *Trans-* and *Cis*-Stilbene Derivatives 305
FEINBERG, M. J., and T. E. HAAS: Model Two-Electron Chemical Bonds and the Concept of Electronegativity 290
FRAGA, S.: see MALLI, G. 75
— see MALLI, G. 80
FURLANI, C., E. CERVONE, F. CALZONA, and B. BALDANZA: Crystal Spectrum of Bis-trimethylbenzylammoniumtetrachlorocuprate (II) 375

GAMBA, A.: see FAVINI, G., and S. TROVATO 305
GOLDSTEIN, J. H.: see WATTS, V. S. 181
GOŁĘBIEWSKI, A., and A. PARCZEWSKI: Steric Effect in Biphenyl According to SC LCAO MO and Limited CI Methods 171
GRIMISON, A.: see ADAM, W. 342

HAAS, T. E.: see FEINBERG, M. J. 290
HALL, L. H.: see HERNDON, W. C. 4
HANSEN, A. E.: On the Importance of Correlation Effects for the Parameters of Semi-Empirical Molecular Orbital Calculations 230

Pagina

HARTMANN, H., u. G. KOHLMAIER: Zur Kristallfeld-Polarisation. I. Berechnung von Multipol-Polarisierbarkeiten für Atome und Ionen mit Edelgaskonfiguration . . . 189
— — Zur Kristallfeld-Polarisation. II. Berechnung der Feldstärkekoeffizienten und der Polarisationsenergie in Ionenkristallen unter besonderer Berücksichtigung der beobachteten Strukturen der Alkali-Halogenide, der Erdalkali-Chalkogenide und der III-V-Verbindungen . . . 196
— s. ILTEN, D. . . . 402
HERNDON, W. C. and L. H. HALL: Extended Hückel Theory Applied to Chemical Reactivity. I. Diels-Alder Reactions of Cyclopentadiene, Cyclopentadienone, and Maleic Anhydride . . . 4
HINCHLIFFE, A.: CI Calculation of Spin Densities in π-Radicals and Ions using Hückel Orbitals as a Basis . . . 25
HOLT, S. L., and C. J. BALLHAUSEN: Low Temperature Absorption Spectra of $KMnO_4$ in $KClO_4$ . . . 313

ILTEN, D., u. H. HARTMANN: Das mittlere Quadrat des Abstands des Elektrons von der interatomaren Achse im Zweizentrenproblem . . . 402

JUG, K.: Perimeterkoordinaten für Vierteilchensysteme . . . 167
JULG, A., et P. CARLES: Recherches complémentaires sur la théorie L.C.A.O. améliorée. III. Réduction des intégrales de coeur (A^+, *ab*). Application au pyrrole et à la formamide . . . 103

KAYA, K., and S. NAGAKURA: Vacuum Ultraviolet Absorption Spectra of Simple Amides 117
— — Electronic Absorption Spectra of Hydrogen Bonded Amides . . . 124
KOHLMAIER, G.: s. HARTMANN, H. . . . 189
— s. HARTMANN, H. . . . 196
KUNII, T.: see KURODA, H. . . . 220
KURODA, H., and T. KUNII: SCF MO Calculations of Tropone, Tropolone and Related Compounds . . . 220

LEIBOVICI, C., et J. DESCHAMPS: Étude théorique des spectres électroniques de dérives à structure p. quinonique, par la méthode de Pariser-Parr-Pople. II. Oximes de la p. benzoquinone . . . 157
LIM, T. K., et M. A. WHITEHEAD: Modus computandi eigenvectores et eigenaestimationes e matrice densitatis . . . 1
— — Non Self-Consistent Field Theory. — A New Approach in Quantum Mechanical Calculations . . . 48
— — Non Self-Consistent Field Theory. II. A Modification of Roothaans Method . . . 283
LINDNER, P., and O. MÅRTENSSON: The π-Electron Energies of *Cis*- and *Trans*-Stilbene 150

MALLI, G., and S. FRAGA: Physical Properties of Many-Electron Atomic Systems Evaluated from Analytical Hartree-Fock Functions. V. Magnetic Hyperfine Structure Constants . . . 75
— — Physical Properties of Many-Electron Atomic Systems Evaluated from Analytical Hartree-Fock Functions. VI. Spin-Orbit Coupling Constants . . . 80
MALRIEU, J. P.: see DINER, S. . . . 15
MÅRTENSSON, O.: see LINDNER, P. . . . 150
MOCCIA, R.: A Numerical Method to Obtain a Symmetry-Adapted Basis from the Hamiltonian or a Similar Matrix . . . 85
MOORE, jr. E. B.: A Population Analysis of the Bonding in N_2O_4, B_2Cl_4, B_2F_4, C_2H_4 and C_3H_4 . . . 144

NAGAKURA, S.: see KAYA, K. . . . 117
— see KAYA, K. . . . 124
NISHIMOTO, K.: Electron Interaction in Molecules. II. π-Electronic Structure of Some Aromatic Hydrocarbons and their Derivatives . . . 207

PALMIERI, P., and C. ZAULI: X-Ray Transitions in Compounds of Sulphur: Relativistic Corrections and $K\beta$-, *L*-Spectra . . . 89
PAOLONI, L.: see CIGNITTI, M. . . . 383
PARCZEWSKI, A.: see GOŁĘBIEWSKI, A. . . . 171
PULLMAN, A.: see DENIS, A. . . . 110

Pagina

RAZAFINDRAKOTO, E., et S. BESNAINOU: Influence de la liaison hydrogène intramoléculaire sur les bandes $\pi \rightarrow \pi^*$ de certaines molécules organiques. Théorie electronique 321
RUEDENBERG, K.: Bipolare Entwicklungen, Fouriertransformation und Molekulare Mehrzentren-Integrale 359
RUCH, E., A. SCHÖNHOFER und I. UGI: Die Vandermondesche Determinante als Näherungssatz für eine Chiralitätsbeobachtung, ihre Verwendung in der Stereochemie und zur Bereicherung der optischen Aktivität 420

SCHÖNHOFER, A.: s. RUCH, E., u. I. UGI 420
SCHRADER, D. M.: Helium States. I. Novel Wave Functions for Singly Excited ^1S States 97
SICHEL, J. M., and M. A. WHITEHEAD: Atomic Parameters for Semi-Empirical SCF-LCAO-MO Calculations 32
SUARD, M., G. BERTHIER et G. DEL RE: Nova methodus adhibendi approximationem molecularium orbitalium ad plures iuxtapositas unitates 236
SUREAU, A., et G. BERTHIER: Paramètres d'écran et effets de quasi-dégénerescence dans les atomes légers 41

TROVATO, S.: see FAVINI, G., and A. GAMBA 305

UGI, I.: s. RUCH, E., u. A. SCHÖNHOFER 420

VACIAGO, A.: see BONAMICO, M., and G. DESSY 367
VEILLARD, A., and E. CLEMENTI: Complete Multi-Configuration Self-Consistent Field Theory 133

WATTS, V. S., and J. H. GOLDSTEIN: The Effect of Ionicity and Hybridization on the Calculation of Spectroscopic Coupling Parameters and Dipole Moments 181
WHITEHEAD, M. A.: s. LIM, T. K. 1
— see LIM, T. K. 48
— see LIM, T. K. 283
— see SICHEL, J. M. 32

ZAULI, C.: see PALMIERI, P. 89

Relationes

BARBIER, C., et J. SERRE: Décomposition des constantes de couplage nucléaires en éléments de symétrie à l'aide de la théorie des représentations 64
BÉRY, J.-C.: Structure électronique du formaldéhyde et de l'ion formiate 249

KADURA, P.: Modellrechnungen zur symmetrischen Vierzentrenbindung. I. 433

LINDNER, P., and O. MÅRTENSSON: A Semiempirical Approach to Hyperconjugation and Application to Toluene, the Xylenes and Mesitylene 352

MAKSIĆ, Z., and M. RANDIĆ: Ligand Field Matrix Elements for *f*-Electrons 253
MÅRTENSSON, O.: see LINDNER, P. 352
MILLER, K., and J. N. MURRELL: Franck-Condon Factors for Large Aromatic Molecules 69
MURRELL, J. N.: see MILLER, K. 69

RANDIĆ, M.: see MAKSIĆ, Z. 253

SERRE, J.: voir BARBIER, C. 64
SMITH, jr. V. H.: Approximate Natural Orbitals for Carbon ^1S 245

Errata

CSIZMADIA, I. G., M. C. HARRISON, J. W. MOSKOWITZ, and B. T. SUTCLIFFE: Non-Empirical LCAO-MO-SCF-CI Calculations on Organic Molecules with Gaussian Type Functions 156
HARRISON, M. C.: see CSIZMADIA, I. G., J. W. MOSKOWITZ, and B. T. SUTCLIFFE . . . 156
MOSKOWITZ, J. W.: see CSIZMADIA, I. G., M. C. HARRISON, and B. T. SUTCLIFFE 156
SUTCLIFFE, B. T.: see CSIZMADIA, I. G., M. C. HARRISON, and J. W. MOSKOWITZ 156

Pagina

Recensiones

FIGGIS, B. N.: Introduction to Ligand Fields (Ref. R. G. PEARSON) 356

HOCHSTRASSER, R. M.: Molecular Aspects of Symmetry (Ref. J. P. DAHL) 256

KETTLE, S. F. A.: see MURRELL, J. N., and J. M. TEDDER 258

MURRELL, J. N., S. F. A. KETTLE, and J. M. TEDDER: Valence Theory (Ref. J. KOUTECKY) 258

PEACOCK, T. E.: Electronic Properties of Aromatic and Heterocyclic Molecules (Ref. W. H. E. SCHWARZ) 357

TEDDER, J. M.: see MURRELL, J. N., and S. F. A. KETTLE 258

WILCOX, C. H.: Perturbation Theory and Its Applications in Quantum Mechanics (Ref. K. JUG) 73

Theoretica Chimica Acta

In order to avoid delay in publication, this journal is issued at indefinite intervals, according to the material received, and consists of loose numbers, for subsequent assembly in volumes. The price is DM 76.— per volume.

Special attention is drawn to the fact that sole copyright for all languages and countries is transferred to the publishers immediately the manuscript is accepted and published by them. It is a fundamental condition that no manuscript submitted shall have been or will be published elsewhere either at home or abroad.

Unless special permission has been granted by the publishers, no photographic reproductions, microfilms, microphotos or other reproductions of a similar nature may be made of the journals, of individual contributions contained therein or of extracts therefrom.

The reproduction of registered names, trade marks, etc. in this journal, even if not specially indicated, does not warrant the assumption that such names, as defined by the laws affecting protection of trade marks, etc., may be regarded as uncontrolled and therefore for the free use of everybody.

Die Zeitschrift erscheint im Interesse rascher Veröffentlichung nach Maßgabe des eingehenden Materials zwanglos in Heften, die zu Bänden vereinigt werden. Der Preis des Bandes beträgt DM 76,—.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, sie auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,30 pro Seite zu verwenden. ***Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.***

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinn der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

Afin d'assurer la publication la plus rapide possible, la revue paraît à intervalles non réguliers, dans la mesure des articles reçus, sous forme de fascicules séparés qui seront reliés en volumes. Le prix de chaque volume est de 76 DM.

L'attention est tout particulièrement attirée sur le fait qu'une fois le manuscrit accepté et publié par les éditeurs, l'unique copyright pour tous pays et toutes langues leur est réservé. Ne doivent être en principe envoyés que les ouvrages qui n'ont jamais été et ne seront jamais publiés ni dans le pays même de l'auteur ni à l'étranger.

En outre, il n'est pas permis sans l'autorisation expresse des éditeurs de faire des reproductions photographiques, des microfilms, des microphotos, etc. ..., des revues publiées, des communications individuelles ou d'extraits de ces dernières.

La reproduction dans cette revue de marques déposées, marques de fabrique, désignations de marchandises, etc., même sans indication spéciale, n'autorise pas à croire que ces noms définis par la législation commerciale sur les marques et la propriété industrielle puissent être laissés au libre usage de chacun.

Pagina

Commentationes

RUEDENBERG, K.: Bipolare Entwicklungen, Fouriertransformation und Molekulare Mehrzentren-Integrale 359

BONAMICO, M., G. DESSY, and A. VACIAGO: The Crystal Structure of Bis-trimethylbenzylammoniumtetrachlorocuprate (II) 367

FURLANI, C., E. CERVONE, F. CALZONA, and B. BALDANZA: Crystal Spectrum of Bis-trimethylbenzylammoniumtetrachlorocuprate (II) 375

CIGNITTI, M., and L. PAOLONI: The Electronic Structure of Groups of Isomeric Hetero-Aromatic Systems. I. Derivatives of 1,2,4-Oxadiazole 383

ILTEN, D., u. H. HARTMANN: Das mittlere Quadrat des Abstands des Elektrons von der interatomaren Achse im Zweizentrenproblem 402

BARNETT, G. P.: Reduced-Density-Matrix Theory: The Electron-Pair Approximation 410

RUCH, E., A. SCHÖNHOFER und I. UGI: Die Vandermondesche Determinante als Näherungsansatz für eine Chiralitätsbeobachtung, ihre Verwendung in der Stereochemie und zur Berechnung der optischen Aktivität 420

Relatio

KADURA, P.: Modellrechnungen zur symmetrischen Vierzentrenbindung. I 433

Springer-Verlag, Berlin · Heidelberg · New York

Druck: Carl Ritter & Co., Wiesbaden

Printed in Germany

Verantwortlich für den Anzeigenteil: Edgar Seidler, 1 Berlin 31 (Wilmersdorf), Heidelberger Platz 3